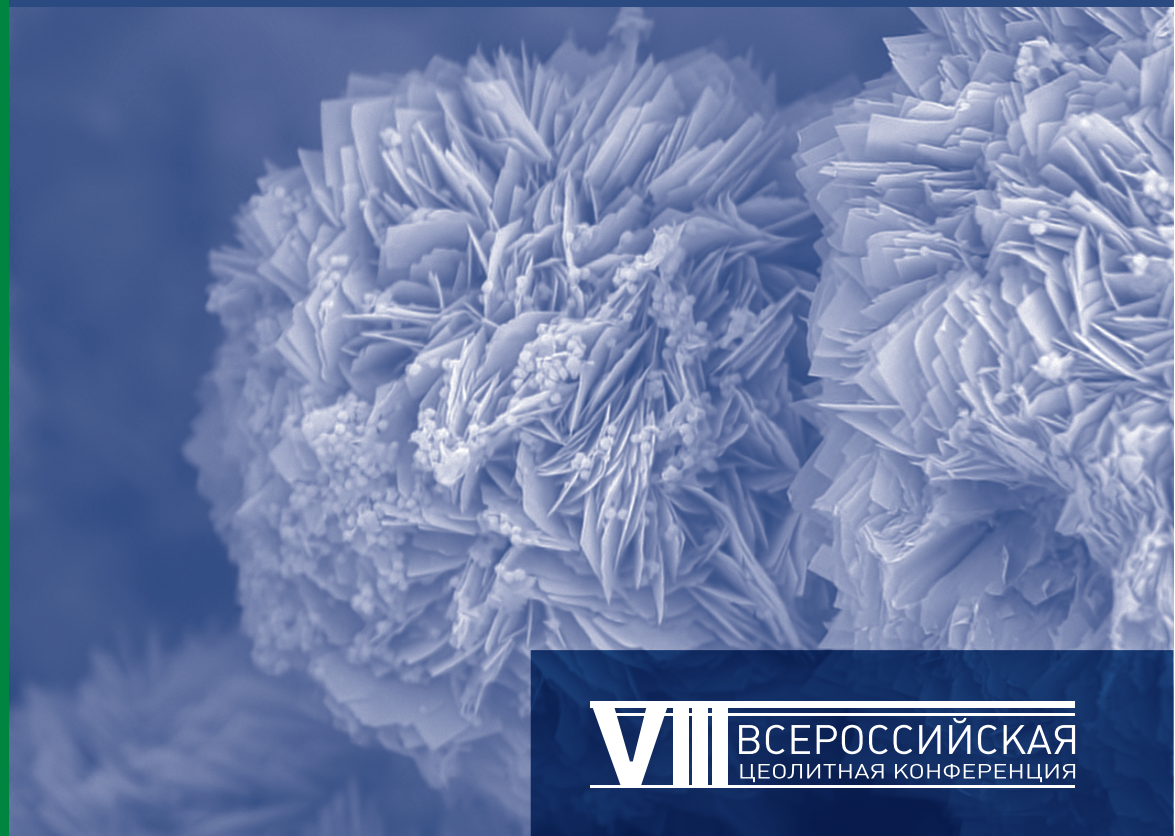




8-ая ВСЕРОССИЙСКАЯ ЦЕОЛИТНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

ЦЕОЛИТЫ И МЕЗОПОРИСТЫЕ МАТЕРИАЛЫ:
ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

8-ая ВСЕРОССИЙСКАЯ ЦЕОЛИТНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ



VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ
ЦЕОЛИТНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Уфа, 18-20 июня 2018 г.

Оглавление

<u>Пленарные доклады</u>	стр
ПЛ-01 Голубева О.Ю. О научном наследии С.П. Жданова	18
ПЛ-02 Максимов А.Л. Цеолитсодержащие дисперсные и наноразмерные каталитические системы для превращения углеродсодержащего сырья	20
ПЛ-03 Нестеренко Н.С. Промышленное применение цеолитов: успехи и перспективы	22
ПЛ-04 Исаева В.И. Синтез и применение гибридных материалов на основе металл-органических каркасов (MOF)	24
ПЛ-05 Пирютко Л.В. Одномерные цеолиты: свойства и перспективные катализаторы на их основе	26
<u>Ключевые доклады</u>	стр
КЛ-01 Jörg Kärger Diffusion in zeolites: paradigm shift by Zhdanov zeolites	30
КЛ-02 Степанов А.Г., Габриенко А.А., Арзуманов С.С., Токтарев А.В. Активация метана на цинк-модифицированных цеолитах. Влияние молекулярного кислорода и состояния цинка	32
КЛ-03 Коц П.А., Иванова И.И. Механизмы формирования и каталитического действия лююисовских кислотных центров металлзамещенных цеолитов	34
КЛ-04 M. Dusselier Small-pore aluminosilicate zeolites: synthesis, al-distribution and catalysis	36
КЛ-05 Ечевский Г.В., Вэйсинь Ци, Чуньмей Ду, Токтарев А.В., Коденев Е.Г. Точки бифуркации в технологиях получения низкозастывающих дизельных топлив и базовых масел	38

КЛ-06	Григорьева Н.Г., Гатаулин А.Р., Бикбаева В.Р., Костылева С.А., Филиппова Н.А., Просочкина Т.Р., Кутепов Б.И. Новые возможности цеолитов и мезопористых материалов в синтезе N-гетероциклических соединений	40
КЛ-07	Капустин В.М., Чернышева Е.А. Цеолиты в катализаторах и процессах гидрокрекинга	41
КЛ-08	Рыбаков А.А., Брюханов И.А., Ларин А.В., Трубников Д.Н., Жидомиров Г.М. Теоретическое моделирование схемы Саегузы синтеза диметилкарбоната на биядерных кластерах меди в цеолитах CuNaX	43
КЛ-09	Колягин Ю.Г., Иванова И.И. Спектроскопия ЯМР in situ в исследовании гидротермального синтеза цеолитов	45
<u>Устные доклады</u>		стр
Секция Ф: Физико-химические методы исследования, характеристика, исследование механизма, теория и моделирование.		
УД-Ф01	Данилова И.Г., Дик П.П., Казаков М.О., Габриенко А.А., Паукштис Е.А., Сорокина Т.П., Доронин В.П., Климов О.В., Носков А.С. Влияние кислотности H-REY на гидрокрекинг вакуумного газойля на многослойных пакетах NiMo катализаторов	48
УД-Ф02	Прокофьев В.Ю., Гордина Н.Е. Использование изоконверсионных методов анализа неизотермической кинетики твердофазных реакций в процессе синтеза цеолитов	50
УД-Ф03	Габриенко А.А., Арзуманов С.С., Данилова И.Г., Степанов А.Г. Метод ЯМР и ИК спектроскопии для определения абсолютных концентраций бренstedовских кислотных центров цеолитов	52
УД-Ф04	Колоколов Д.И., Художитков А.Э., Степанов А.Г. Структурная подвижность в пористых металл-органических каркасах как ключевой фактор определяющий эффективность разделения углеводородов	54

УД-Ф05	Артюшевский Н.А., Коложвари Б.А., Дрожжин В.Р., Федосов Д.А. Электрохимическая активация металлических носителей для синтеза цеолитных покрытий	56
Секция М: Новые цеолитные и мезопористые материалы. Синтез, модифицирование.		
УД-М01	Сашкина К.А., Аюпов А.Б., Лысиков А.И., Рудина Н.А., Пархомчук Е.В. Цеолиты: пути управления текстурой	58
УД-М02	Кутихина Е.А., Черных Я.Ю., Верещагина Т.А. Гидротермальный синтез анальцима и композита ZrO ₂ -анальцим на основе ценосфер летучих зол	60
УД-М03	Лебедева О.Е., Рыльцова И.Г. Слоистые двойные гидроксиды со структурой гидроталькита, содержащие катионы металлов переменной валентности	62
УД-М04	Аглиуллин М.Р., Хайруллина З.Р., Файзуллин А.В., Петров А.И., Бадретдинова А.А., Кутепов Б.И. Зависимость фазовой чистоты и степени кристалличности алюмофосфатов и силикоалюмофосфатов со структурой AEL от свойств исходных гелей	64
УД-М05	Чуньмей Ду, Токтарев А.В., Аксёнов Д.Г., Коденев Е.Г., Ечевский Г.В. Исследование процесса кристаллизации силикоалюмофосфатов SAPO-11 и продуктов его синтеза	66
УД-М06	Герзелиев И.М., Остроумова В.А., Басханова М.Н. Интенсификация ионного обмена цеолита типа FAU при синтезе активного и селективного катализатора алкилирования изобутана бутиленами	68
УД-М07	Бок Т.О., Андриако Е.П., Колягин Ю.Г., Князева Е.Е., Иванова И.И. Влияние механизма синтеза на свойства цеолита Бета	70
УД-М08	Травкина О.С., Куватова Р.З., Докшин И.Ю., Кутепов Б.И. Гранулированные мордениты высокой степени кристалличности с иерархической пористой структурой. Синтез и свойства	72

УД-М09	Тюлюкова И.А. , Рудина Н.А., Пархомчук Е.В. Получение кристаллов цеолитоподобного материала SAPO-11 с новой морфологией и текстурой	74
УД-М10	Бокарев Д.А., Мытарева А.И. , Баева Г.Н., Стахеев А.Ю., Веннестрём П.Н.Р, Янссенс Т.В.У. Новый безотходный метод синтеза высокоактивных Cu цеолитов	76
УД-М11	Доронин В.П., Сорокина Т.П., Потапенко О.В. , Гуляева Т.И., Талзи В.П., Дроздов В.А. Формирование свойств ультрастабильного цеолита типа Y при обработке лимонной и винной кислотами	78
УД-М12	Воробкало В.А., Попов А.Г., Князева Е.Е. , Иванова И.И. Направленное регулирование физико-химических и каталитических свойств цеолита MEL в ходе двухстадийного синтеза	80
УД-М13	Павлова И.Н. , Гариева Г.Ф, Кутепов Б.И. Влияние природы обменного катиона на адсорбцию молекул H ₂ O, n-C ₇ H ₁₆ , C ₆ H ₆ и CO ₂ цеолитом LSX	82
Секция К: Каталитические процессы на основе цеолитов и мезопористых материалов.		
УД-К01	Коннов С.В. , Павлов В.С., Коц П.А., Иванова И.И. Особенности механизма дезактивации SAPO-34 в процессе превращения метанола в низшие олефины в сларри реакторе	84
УД-К02	Матиева З.М. , Колесниченко Н.В., Хаджиев С.Н. Особенности модифицирования цинком цеолитного катализатора конверсии диметилового эфира в углеводороды	86
УД-К03	Локтев А.С., Караваев А.А. , Дедов А.Г. Микро-мезопористый композит ZnCrMFI/MCM-41 - новый катализатор получения п-ксилола конверсией изобутанола	88
УД-К04	Потапенко О.В. , Худяков М.С., Плехова К.С., Алтынкович Е.О., Сорокина Т.П., Доронин В.П. Моно- и полицеолитные катализаторы крекинга углеводородов бензиновой фракции	90

УД-К05	Восмери́кова Л.Н., Барба́шин Я.Е., Восмери́ков А.А. Исследование влияния способа и условий предварительной обработки галлоалюмосиликата на его физико-химические и каталитические свойства в превращении пропана	92
УД-К06	Яшник С.А., Исмаги́лов З.Р. Особенности каталитического действия Cu-ZSM-5 в СКВ NO-NH ₃	94
УД-К07	Бубеннов С.В., Серебренников Д.В., Аглиуллин М.Р., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И. Мезопористые алюмосиликаты - высокоэффективные катализаторы олигомеризации непредельных соединений	96
УД-К08	Дик П.П., Голубев И.С., Казаков М.О., Данилова И.Г., Надеина К.А., Перейма В.Ю., Будуква С.В., Климов О.В., Просвирин И.П., Бок Т.О., Добрякова И.В., Князева Е.Е., Иванова И.И., Носков А.С. Гидрокрекинг вакуумного газойля на катализаторах NiMo/Цеолит-Al ₂ O ₃ : влияние кислотных свойств цеолитов	98
УД-К09	Липин П.В., Потапенко О.В. Гуляева Т.И., Сорокина Т.П., Доронин В.П. Влияние модифицирования цеолитов типа у и ZSM-5 фосфором для повышения выхода олефинов C ₃ и C ₄ при крекинге сырья нефтяного и растительного происхождения	100
УД-К10	Ефимов А.В., Попов А.Г., Иванова И.И. Олигомеризация лёгких алкенов на гибридных катализаторах, содержащих цеолит структуры MFI и силикалит-1	102
УД-К11	Бобкова Т.В., Потапенко О.В., Доронин В.П., Сорокина Т.П., Гуляева Т.И. Превращение н-ундекана и кумола в присутствии гетероциклических соединений азота и серы на катализаторах крекинга с различным содержанием редкоземельных элементов	104
УД-К12	Никифоров А.И., Тябликов И.А., Попов А.Г., Иванова И.И. Исследование влияния текстурных характеристик мезопористого силиката SBA-15 как носителя на каталитическую активность MOS ₂ в процессе гидрообессеривания тиофена	106

<u>Короткие устные доклады</u>	стр
КУД-01 Яковенко Р.Е., Савостьянов А.П., Нарочный Г.Б. Использование цеолитов в синтезе низкозастывающего дизельного топлива из СО И Н ₂	110
КУД-02 Яшина О.В., Ежова Н.Н., Стащенко А.Н., Колесниченко Н.В., Хаджиев С.Н. Формирование наноразмерных частиц катализаторов на основе цеолитов типа MFI методом ультразвуковой обработки в дисперсных средах	112
КУД-03 Гордина Н.Е., Прокофьев В.Ю., Константинова Е.М., Войнова В.В., Борисова Т.Н. Влияние ультразвуковой обработки на синтез гранулированных без связующих низкомодульных цеолитов	114
КУД-04 Милютин В.В., Некрасова Н.А., Козлитин Е.А. Селективные неорганические сорбенты для извлечения радионуклидов цезия и стронция из водных растворов	116
КУД-05 Гатаулин А.Р., Костылева С.А., Хазипова А.Н., Аглиуллин М.Р., Григорьева Н.Г., Кутепов Б. И. Синтез 2-этил-3-метил-хинолина на кристаллических и аморфных алюмосиликатах	117

<u>Промышленная секция</u>	стр
ПС-1 Лутченко А.С., Потапенко О.В., Доронин В.П., Гурьевских С.Ю. Современная пилотная установка по испытанию микросферических цеолитсодержащих катализаторов крекинга	120
ПС-2 Усманов И.Ф., Бодрый А.Б., Гариева Г.Ф. Разработки ишимбайского специализированного химического завода катализаторов в области производства добавок к катализаторам каталитического крекинга	122
ПС-3 Попов А.Г., Федосов Д.А., Ефимов А.В., Князева Е.Е., Иванова И.И., Кузнецов С.Е., Клейменов А.В., Мирошкина В.Д. Разработка катализатора олигомеризации бутан-бутиленовой фракции	124
ПС-4 Зотов Р.А. Организация производства микросферических катализаторов крекинга ООО «СкатЗ»	126

<u>Стендовые доклады</u>	стр
Секция А: Адсорбция, диффузия, ионный обмен, концентрирование, разделение.	
СД-А01 Федосов Д.А., Атякшева Л.Ф. Добрякова И.В. , Иванова М.В., Иванова И.И. Адсорбция галактоцереброзида на силикалите-1	130
СД-А02 Атякшева Л.Ф., Тарасевич Б.Н., Федосов Д.А. , Иванова И.И. Адсорбция белков на силикалите-1	132
СД-А03 Карасева М.Д. , Тишин А.А., Гуркин В.Н., Курчатов И.М., Лагунцов Н.И. Гибридная система осушки компримированных газов	134
СД-А04 Карасева М.Д. , Тишин А.А., Гуркин В.Н., Курчатов И.М., Лагунцов Н.И. Гибридный мембранно-адсорбционный генератор кислорода	136
СД-А05 Иванова Е.Н., Алехина М.Б. , Дудолодов А.О., Губайдуллина Г.Ф. Высококремнистые цеолиты типов Y и ZSM-5, модифицированные наночастицами переходных металлов, для разделения газовой смеси аргон-кислород	138
Секция К: Каталитические процессы на основе цеолитов и мезопористых материалов.	
СД-К01 Каримова А.Р. , Хамзин Ю.А., Гаеткулова Г.К., Денисенко К.В., Салимова М.Р. Регенерация гетерогенных катализаторов в сверхкритических условиях	140
СД-К02 Каримова А.Р., Мурзабекова А. , Шерстобитова А.К., Тарасенко И.М. Получение изо-алканов синтезом Фишера – Тропша на модифицированных пиллар-глинах	141
СД-К03 Хамзин Ю.А. , Гаеткулова Г.К., Шириязданов Р.Р., Давлетшин А.Р. Цеолитсодержащие катализаторы в процессе алкилирование изобутана бутиленами	143
СД-К04 Восмерилов А.В. , Величкина Л.М., Барбашин Я.Е. Совместная переработка пропан-бутановой фракции и гептана на модифицированных цеолитах	145

СД-К05	Степанов А.А., Коробицына Л.Л., Восмериков А.В. Влияние рения на активность и стабильность Mo/ZSM-5 катализаторов в процессе неокислительной конверсии метана	147
СД-К06	Костылева С.А. , Гатаулин А.Р., Хазипова А.Н., Аглиуллин М.Р., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И. Синтез N-[(1E)-(4-бромфенил)метилен]анилина на кристаллических и аморфных алюмосиликатах	149
СД-К07	Бикбаева В.Р. , Хасанова А.Н., Костылева С.А., Григорьева Н. Г., Просочкина Т.Р., Кутепов Б. И. Синтез 2-алкил(арил)-1н-бензимидазолов в присутствии цеолитных катализаторов	150
СД-К08	Чистов Д.Л., Пономарева О.А. , Коц П.А., Иванова И.И. Синтез изопрена из формальдегида и изобутилена на цеолитных катализаторах	151
СД-К09	Павлов М.Л. , Эрштейн А.С., Шавалеев Д.А., Басимова Р.А. Разработка катализатора и процесса жидкофазного алкилирования бензола этан-этиленовой фракцией пиролиза углеводородов	153
СД-К10	Хасанова А.Н. , Бикбаева В.Р., Костылева С.А., Григорьева Н.Г., Просочкина Т.Р., Кутепов Б.И. Цеолитные катализаторы в синтезе 2,2,4-триметил-2,3-дигидро-1н-1,5-бензодиазепина	155
СД-К11	Серебренников Д.В. , Бубеннов С.В., Хазипова А.Н., Бадикова А.Д., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И. Олигомеризация амиленов на цеолитных катализаторах различного структурного типа	157
СД-К12	Лазарева С.В. , Пирютко Л.В., Чернявский В.С., Харитонов А.С. Влияние топологии и химического состава цеолитов МТТ и MFI на каталитические свойства в реакции изомеризации окиси этилена в ацетальдегид	159
СД-К13	Таран О.П., Яшник С.А. , Болтенков В.В., Бабушкин Д.Э., Пармон В.Н. Cu-ZSM-5 катализаторы селективного окисления метана	161
СД-К14	Жмылев В.П. , Остроумова В.А., Герзелиев И.М., Хаджиев С.Н. О стабильности цеолитных катализаторов алкилирования и трансалкилирования бензола	163

СД-К15	Дмитриев К.И. , Потапенко О.В., Бобкова Т.В., Сорокина Т.П., Доронин В.П. Добавки на основе гидротальцитов к цеолитсодержащему катализатору крекинга для снижения СО и NO _x в газах регенерации	165
СД-К16	Пономарев А.Б., Смирнов А.В. , Шостаковский М.В. Дегидрирование пропана на Pt-содержащих цеолитных катализаторах, модифицированных Cu И Zn	167
СД-К17	Джалилова С.Н. Превращение пропан-бутановой фракции в жидкие углеводороды на цеолитных катализаторах модифицированных оксидом цинка	169
СД-К18	Павлов В.С. , Коннов С.В, Иванова И.И. Гидрокрекинг n-гексадекана в сларри реакторе на модифицированных платиной цеолитах типа FAU	171
СД-К19	Иванушкин Г. Г. , Смирнов А. В., Пономарев А.Б., Иванова И.И. Модифицирование кислотных свойств подложки катализаторов дегидрирования пропана Pt-Sn/Beta	173
СД-К20	Туркин А.А. , Смирнов А.В., Попов А.Г., Иванова И.И. Низкотемпературная конверсия метана в метанол на системе медь-морденит	175
СД-К21	Пономарева О.А., Шапошник П.А. , Касьянов И.А., Добрякова И.В., Коннов С.В., Иванова И.И. Получение и каталитические свойства CsNaFAU(Y) с высоким содержанием цезия	177
СД-К22	Корнаухова Н.А. , Закарина Н.А., Жумадуллаев Д.А. Влияние способов введения титана на изомеризующую активность Ni- катализаторов на основе таганского монтмориллонита	179
СД-К23	Хуснутдинов Р.И., Щаднева Н.А., Маякова Ю.Ю. Реакции адамантил- и диамантилбромидов с диметилкарбонатом в присутствии цеолитных катализаторов	181
СД-К24	Кирсанов В.Ю. , Яныбин В.М., Рахимова Е.Б., Ибрагимов А.Г. Синтез бис-адамантилзамещенных полиазаполициклов с участием цеолита HY-BC в качестве катализатора	183

СД-К25	Муниров Т.А., Амангельдиев Д. М. , Мунирова А.А. Исследование влияния предварительной подачи ВСГ на состав продуктов, полученных при проведении ароматизации сырья риформинга на цеолитном катализаторе	185
СД-К26	Дементьев К.И., Бабкин Ю.А., Паланкоев Т.А. , Хаджиев С.Н. Особенности коксообразования при деполимеризации полистирола в углеводородной среде на различных цеолитных катализаторах	187
СД-К27	Байбуртли А.В. , Раскильдина Г.З., Злотский С.С. Синтез простых эфиров норборнена и сложных эфиров масляной кислоты в присутствии цеолитных катализаторов	189
СД-К28	Локтев А.С., Мухин И.Е. , Караваев А.А., Дедов А.Г., Моисеев И.И. Катализаторы кислородной и углекислотной конверсии метана на основе цеолитов MFI	191
СД-К29	Афокин М.И. , Пересыпкина Е.Г., Давыдов И.А. Цеолиты ZSM-5 в прямом синтезе диметилового эфира	192
СД-К30	Кипнис М.А. , Белостоцкий И.А., Волнина Э. А., Маршев И.И. Определение оптимальных условий предварительной обработки цеолитных катализаторов синтеза олефинов	193
СД-К31	Обухова Т.К. , Колесникова Е.Е., Колесниченко Н.В., Бондаренко Г.Н. Влияние ультразвуковой обработки магний-содержащего цеолитного катализатора на его кислотные и каталитические свойства	195
СД-К32	Никкульшин П.А., Красильникова Л.А., Гуляева Л.А., Шмелькова О.И., Битиев Г.В. , Ишутенко Д.И. Гидроизомеризация продуктов деоксигенации непищевых растительных масел на цеолитсодержащих катализаторах	197
Секция М: Новые цеолитные и мезопористые материалы. Синтез, модифицирование.		
СД-М01	Сушкевич В.Л., Коц П.А. , Якимов А.В., Колягин Ю.Г., Иванова И.И. Природа, сила и концентрация кислотных центров брэнстеда в оловосодержащих цеолитах ВЕА	199
СД-М02	Шкуропатов А.В. , Князева Е.Е., Добрякова И.В., Колягин Ю.Г., Пономарева О.А., Иванова И.И. Влияние условий получения на свойства	201

рекристаллизованного цеолита MWW

СД-М03 **Виноградов Н.А.**, Касьянов И.А., Иванова И.И., Кукин В.Н.,
Волков Р.Л., Боргардт Н.И. **203**
Механизм формирования внутрикристаллической системы
мезопор в ходе рекристаллизации

СД-М04 Аглиуллин М.Р., **Хайруллина З.Р.**, Файзуллин А.В.,
Петров А.И., Бадретдинова А.А. **205**
Влияние природы источника алюминия на кинетику
кристаллизации алюмофосфата $AlPO_4-11$

СД-М05 **Никифоров А.И.**, Тябликов И.А., Иванова И.И., Князева Е.Е.,
Пономарёва О.А. **207**
Влияние параметров синтеза морденита на его структуру и
свойства

**Секция Ф: Физико-химические методы исследования,
характеристика, исследование механизма, теория и
моделирование.**

СД-Ф01 Брюханов И.А., **Рыбаков А.А.**, Ларин А.В., Трубников Д.Н.,
Веркаутерен Д.П. **209**
Влияние гидратации на упругие свойства алюмосиликатных
форм цеолитов

СД-Ф02 **Засухин Д.С.**, Якимов А.В., Колягин Ю.Г., Иванова И.И. **211**
Влияние затравки на кристаллизацию цеолита со
структурным типом FAU(Y) по данным спектроскопии ЯМР
твёрдого тела

СД-Ф03 **Дабижа О.Н., Патеюк Т.П.** **213**
Исследование разупорядочения структуры механокомпозитов
«ионная соль-клиноптилолит»

ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ НА УПРУГИЕ СВОЙСТВА АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ ФОРМ ЦЕОЛИТОВ

Брюханов¹ И.А., Рыбаков² А.А., Ларин² А.В., Трубников² Д.Н., Веркаутерен³ Д.П.

¹Научно-исследовательский институт механики МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва,

²Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В.

Ломоносова, Москва,

³Университет Намюра, Бельгия

E-mail: rybakovy@gmail.com

Противоположные тенденции упругих постоянных (объёмного модуля и модуля Юнга) относительно гидратации были показаны для алюмосиликатных форм цеолитов с катионами щелочных и щелочноземельных металлов [1]. Были использованы модели чисто кремниевых, алюмофосфатных и катионных форм алюмосиликатов, содержащие молекулы воды и полностью дегидратированные, оптимизированные в обоих случаях на уровне теории функционала плотности (PBE-D2 [2], PBE-D3 [3]) с пакетом VASP [4]. Для всех моделей рассчитывалась теплота гидратации и сравнивалась с доступными экспериментальными величинами. По результатам расчётов и сравнения с экспериментом найдено, что объёмный и модуль Юнга алюмосиликатных форм цеолитов с щелочными катионами уменьшаются при добавлении воды, а с щелочноземельными катионами - растут. В качестве причины падения упругих постоянных щелочных форм показана более слабая координация катионов к кислороду каркаса вследствие конкурирующей координации катионов кислородами молекул воды и смещения их от каркаса. Аналогичный механизм падения упругих постоянных был ранее обнаружен при образовании карбонатов [5,6], приводящих к существенной миграции щелочных катионов, фактически экранирующих образующийся карбонат- или гидрокарбонат-анион от анионного каркаса цеолита. Миграция тяжёлых катионов (Me = K, Cs) особенно выражена и приводит к стабилизации карбонатов в центре больших суперполостей цеолитов MeY, в отличие от более жёстко координированных к каркасу Li и Na [7]. При этом координационные числа щелочных катионов существенно не меняются после гидратации, в отличие от щелочноземельных форм цеолитов, где координационные числа возрастают и приводят к повышенной стабильности системы. В последних более высокая координация щелочноземельных катионов относительно щелочных катионов, как правило, не достигается при отсутствии воды из-за жёсткости цеолитного каркаса. Обсуждена и предложена модель цеолита с щелочноземельными катионами (BaEDI), в которой, аналогично BaPHI [8], возможна полная дегидратация без разрушения каркаса, несмотря на

то, что предыдущая попытка полной дегидратации была неудачной [9], предположительно, из-за значительной примеси катионов Са.

Список литературы.

1. Bryukhanov I.A. et al. The role of water in the elastic properties of aluminosilicate zeolites: DFT investigation // J. Mol. Model. Journal of Molecular Modeling, 2017. Vol. 23, № 3. P. 68.
2. Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction // J. Comput. Chem. 2006. Vol. 27, № 15. P. 1787–1799.
3. Grimme S. et al. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu // J. Chem. Phys. 2010. Vol. 132, № 15. P. 154104.
4. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 47, № 1. P. 558–561.
5. Bryukhanov I.A. et al. Influence of carbonate species on elastic properties of NaX and NaKX zeolites // Microporous Mesoporous Mater. Elsevier Inc., 2014. Vol. 195. P. 276–283.
6. Bryukhanov I.A. et al. Chemical reduction of the elastic properties of zeolites: a comparison of the formation of carbonate species versus dealumination. // Dalton Trans. 2015. Vol. 44, № 6. P. 2703–2711.
7. Larin A.V. Role of cation size for hydrogen carbonate stabilization and modification of the zeolite–CO₂ interaction energy: Computational analysis in alkali Y zeolites // Microporous Mesoporous Mater. 2016. Vol. 228. P. 182–195.
8. Sani A., Cruciani G., Gualtieri A.F. Dehydration dynamics of Ba-phillipsite: an in situ synchrotron powder diffraction study // Phys. Chem. Miner. 2002. Vol. 29, № 5. P. 351–361.
9. Ståhl K., Hanson J.C. An in situ study of the edingtonite dehydration process from X-ray synchrotron powder diffraction // Eur. J. Mineral. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, 1998. Vol. 10, № 2. P. 221–228.